3. Übung QFT für Vielteilchen-Systeme

19.04.2012, 14:00-16:00, Seminarraum 138C

1. Basiswechsel in 2. Quantisierung *2+2+2=6 Punkte*

a) Seien $a^\dagger_\alpha$ und a_α die Erzeugungs/Vernichtungs-Operatoren in einer bestimmten Einteilchen-ON-Basis $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$, so hat man in Besetzungszahldarstellung $a^\dagger_\alpha|0\rangle \equiv |0,0,..., \overset{Zust.\,\alpha}{1}, 0,0,...\rangle$. Betrachten Sie nun eine andere ON-Basis $\{|\varphi_\beta\rangle\}$ und drücken Sie die Erzeugung/Vernichtungs-Operatoren $a^\dagger_\beta$ und a_β, die zu dieser neuen Basis gehören, durch $a^\dagger_\alpha$ bzw. a_α aus. Hinweis: Ausgangspunkt ist die Vollständigkeitsrelation, die man in Besetzungszahldarstellung schreiben kann.

b) Beweisen Sie, ausgehend von den (Anti-)Vertauschungrelationen für (Fermionen)Bosonen, dass die Erzeuger/Vernichter in der neuen ON-Basis $\{|\varphi_\beta\rangle\}$ die gleichen (Anti-)Vertauschungrelationen wie $a^\dagger_\alpha$ und a_α erfüllen.

c) Betrachten Sie nun den Hamilton-Operator des eindimensionalen **Hubbard-Modells**

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma,i=1}^{N} \sum_{j=i\pm1} \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}_{i\uparrow}}_{\hat{n}_{i\uparrow}} \underbrace{\hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{i\downarrow}}_{\hat{n}_{i\downarrow}}, \tag{1}$$

wobei periodische Randbedingungen angenommen sind, d.h. $i = N+1 \hat{=} 1$ und $i = 0 \hat{=} N$. (Man kann sich vorstellen, dass das eindimensionale Gitter zu einem Ring verformt wird.)
Der erste Beitrag (t) beschreibt das Hüpfen eines Elektrons vom Gitterplatz i zu einem der beiden benachbarten Gitterplätze $j = i \pm 1$. Er stellt somit die kinetische Energie des Systems dar. Der zweite Beitrag (U) ist die Wechselwirkung zweier Elektronen, die denselben Gitterplatz i besetzen. (Beachten Sie, dass dies aufgrund des Pauli-Prinzips nur für Elektronen mit unterschiedlichen Spins möglich ist.) Dieser Term entspricht der potentiellen Energie des Systems.
Berechnen Sie für $\boldsymbol{U=0}$ die Energieeigenwerte mit Hilfe des folgenden Basiswechsels $\hat{c}^\dagger_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x_i} \mathrm{e}^{-ikx_i}\, \hat{c}^\dagger_i$, wobei $\hat{c}^\dagger_i$ und $\hat{c}_i$ der Erzeugungs/Vernichtungs-Operatoren für ein Elektron auf dem Gitterplatz $x_i = i\,\ell$, mit $i = 1,...N$ sind (ℓ ist die Gitterkonstante). Wie kann man das Ergebniss für 2 bzw. 3 Dimensionen erweitern?

2. Wechselwirkung in 2. Quantisierung *1+3+2*=4+2* Punkte*

a) Stellen Sie den Impuls-Operator $\hat{p}$ in der Ortsraumbasis und den Orts-Operator $\hat{r}$ in der Impulsraumbasis in zweiter Quantisierung dar.

b) Stellen Sie den Hamilton-Operator für wechselwirkende Elektronen

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2}$$

in Ortsraumdarstellung in zweiter Quantisierung dar. Transformieren Sie das Ergebnis anschließend in die Impulsdarstellung. Stellen Sie den Potentialteil des Hamilton-Operators (Feynman-)diagrammatisch dar indem Sie eine gerade Linie für die Elektronen und eine Wellenlinie für die Wechselwirkung verwenden.

c) Gegeben sei der 2-Fermionen-Zustand

$$|\Phi\rangle = \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |0\rangle, \tag{3}$$

wobei $|0\rangle$ das Vakuum ist, das keine Teilchen enthält. Die Quantenzahlen $1, 2$ bezeichnen 2 (unterschiedliche) Einteilcheneigenzustände eines hermiteschen Einteilchenoperators. Da die Menge aller derartiger Eigenzustände eine vollständige Basis des (Einteilchen-)Hilbertraums bildet lässt sich der Feldoperator $\hat{\psi}^{(\dagger)}(\vec{r})$, der ein Elektron am Ort $\vec{r}$ vernichtet (erzeugt), folgendermaßen darstellen:

$$\hat{\psi}^{(\dagger)}(\vec{r}) = \sum_i \varphi_i^{(*)}(\vec{r})\hat{c}_i^{(\dagger)}. \tag{4}$$

Hierbei vernichtet (erzeugt) $\hat{c}_i^{(\dagger)}$ ein Elektron im Einteilchenzustand i. Die Koeffizienten $\varphi_i(\vec{r})$ sind formal durch

$$\langle 0|\hat{\psi}(\vec{r})\hat{c}_i^\dagger|0\rangle = \varphi_i(\vec{r}) \tag{5}$$

gegeben und stellen die "Transformationsmatrix" der Basistransformation von $\vec{r} \to i$ dar. (In erster Quantisierung entsprechen sie genau den Einteilchenwellenfunktionen in Ortsdarstellung.)

Zeigen Sie zuerst die Antikommutatorrelation

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{c}_i^\dagger\} = \varphi_i(\vec{r}). \tag{6}$$

Berechnen Sie danach den Erwartungswert $\langle\Phi|\hat{\mathcal{H}}|\Phi\rangle$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem von Bsp. 1c aus der ersten Übung.